

**C<sub>n</sub>F<sub>2n+2</sub>(n=1,2,3) 분자가스의 전자수송계수 연구**

전 명훈  
동국대학교

**Study of Electron Transport Coefficients in C<sub>n</sub>F<sub>2n+2</sub>(n=1,2,3) Molecular Gas**

Byung-Hoon Jeon  
Dongguk Univ.

**Abstract** - 반도체 에칭분야에 많이 이용되고 있는 CF<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>F<sub>6</sub>, C<sub>3</sub>F<sub>8</sub>가스의 전자수송계수들을 볼츠만 방정식을 이용하여 해석하고자 한다. 특히 혼합가스를 이용하여 확산방전스위치에서 요구되어지는 특성을 파악하고자 할 때 시뮬레이션에 의한 적절한 혼합비 구현을 위하여 이들 순수가스들이 가지고 있는 전자충돌단면적을 해석하고, 전자기동속도와 부착계수 값을 2항과 다항근사 볼츠만 해석을 통해 0.1~300 Td에 걸친 광범위 E/N에서 해석하고자 한다.

*l<sub>max</sub>*=1일때 2항근사로 주어진다. 따라서 *l<sub>max</sub>*>2일때를 다항근사라 하며, 이 다항근사 기법은 Robson and Ness[4]에 의해 급진적으로 발전되어졌다. 그들은 전자속도분포함수를 Legendre와 Sonine 급수로 전개하였고, 전자수송계수들은 다양한 Legendre 다항식 *l* 과 Sonine 다항식 *v* 에 의해 다음과 같은 수밀도에서의 연속식으로부터 구하고 있다.

**1. 서 론**

필스파워기술은 짧은 시간동안 용량성 또는 유도성 저장 매체를 이용하여 전기적 에너지를 저장하였다가 차단하거나 개방 스위치를 이용하여 부하에 반복적으로 이동시키는 기술을 말한다. 따라서 이러한 방법으로 필스파워에 사용되는 확산방전스위치는 전도특성과 절연특성 모두를 만족시켜야 하며, 스위치의 개방(전달)단계와 전도(저장)단계에 해당하는 전자기동속도와 부착계수의 값으로 적절한 매개체를 선택 할 수 있다. 전도단계는 약 3Td의 낮은 E/N영역에서 전자기동속도의 최고치를 가지며, 개방단계는 약 120Td의 높은 E/N영역에서 부착계수의 최고치를 갖는 가스가 확산방전스위치에 이용되는 가장 이상적인 가스이다.<sup>[1]</sup> 이와 같이 가스를 이용하여 에칭이나 확산방전스위치 등의 산업기에 이용하기 위해서는 직접 가스를 주입하여 그 특성을 파악하는 경우도 있지만 효율성과 경제성을 고려하여 시뮬레이션 방법을 사용한다. 이때 시뮬레이션을 통해 정확한 물성적 파라미터를 얻기 위해서는 가스가 가지고 있는 정확한 전자충돌단면적이 필요하며, 그 데이터는 전자군방법과 전자빔 방법을 통해 얻어지고 있다.

$$\partial_t n = -\alpha n - W \partial_x n + D_T (\partial_x^2 + \partial_y^2) n + D_L \partial_z^2 n \quad \dots\dots\dots (2-2)$$

여기서  $\alpha$ 는 부착계수,  $W$ 는 전자기동속도,  $D_L$ ,  $D_T$ 는 종축확산, 횡축확산계수를 나타내고 있고, 각각의 전자수송계수는 다음과 같이 나타내고 있다.

<부착계수>  

$$\alpha = 4\pi \int_0^\infty J_R^{(0)} [f(00|00)] v^2 dv \quad \dots\dots\dots (2-3)$$

<전자기동속도>  

$$W = i \left[ \frac{4\pi}{3} \right]^{1/2} \int_0^\infty v^3 f(10|00) dv - i \sqrt{4\pi} \int_0^\infty v^2 J_R^0 [f(00|11) dv] \quad \dots\dots\dots (2-4)$$

<종축확산계수>  

$$D_T = \left[ \frac{4\pi}{3} \right]^{1/2} \left[ \int_0^\infty v^3 f(11|11) dv + \int_0^\infty J_R^0 \left( f(00|20) + \frac{1}{\sqrt{2}} f(00|20) \right) v^2 dv \right] \quad \dots\dots\dots (2-5)$$

<횡축확산계수>  

$$D_L = - \left[ \frac{4\pi}{3} \right]^{1/2} \left[ \int_0^\infty v^3 f(10|11) dv + \int_0^\infty J_R^0 (f(00|20) - \sqrt{2} f(00|22)) v^2 dv \right] \quad \dots\dots\dots (2-6)$$

**2. 볼츠만 방정식 해석**

기체 중에서 하전입자군의 수송계수를 측정하는 방법에는 2항근사와 다항근사 볼츠만 방정식 그리고 몬테칼로 시뮬레이션 기법과 같은 3가지 방법이 있다. 그 중에서도 볼츠만 방정식은 열평형 상태에서가 아닌 다입자계(多粒子系) 운동의 기술에 이용해 이것을 전자군의 거동 해석에 이용하고 있다. 볼츠만 방정식 해석에서는 전자의 거동을 분포함수라고 하는 거시적인 형태로 표시하고, 이 분포함수에서 전자수송계수를 산출한다. 이 방법에서는 충돌의 확률적인 성질을 기초로 하여 전자군 발달(發達)의 통계적 변동은 나타나지 않으며, 통계시간은 비교적 짧다. 그러나 미적분방정식으로 된 볼츠만 방정식은 일반적으로 그 해를 구하는 것이 어렵고, 종래 많이 사용되어왔다. 전자의 속도분포함수를 Legendre 급수로 전개하고, 그 최초의 2항에 근사하는 2항근사는 전자의 속도분포함수에 비등방성이 강한 경우에는 정확한 전자수송계수를 산출할 수 없는 단점을 가지고 있다.

**2.2 2항근사 볼츠만 방정식**

본 연구에서 이용된 2항근사 볼츠만 방정식에서는 TOF(Time of flight)방법을 이용한 전자수송계수 산출을 보여주고 있다. TOF에서는 위치와 시간을 함께 지정하기 때문에 샘플 수는 적고 한편으로 에너지 분포를 구할 때 샘플 수는 차츰 적어져 통계적 변동이 다수 포함한 결과로 되기 쉽다. 전자 수를 많이 택하면 전자계산기의 계산시간도 그에 비례하여 증가하므로 이것을 보완하기 위하여 순수한 관측법에서의 차이를 지정하는 영역에서 어느 정도의 폭을 갖게 한다.

본 논문에서는 다항근사 볼츠만 방정식을 이용하여 CF<sub>4</sub>, C<sub>3</sub>F<sub>8</sub>가스의 전자기동속도와 횡축확산계수의 값을 2항근사 볼츠만 방정식을 이용하여 부착계수의 값을 산출하였다.

**2.1 다항근사 볼츠만 방정식**

전자에서 분자(*M*)와 전자(*m*)의 질량비가 1보다 상당히 작기 때문에,  $m/M \ll 1$ , 단지 탄성충돌만이 일어나는 속도 공간 내에서의 전자분포함수는 거의 등방성으로 작용하므로 2항근사는 구면조화(Spherical Harmonic)로 표현할 필요가 있다. 구면조화에서의 분포함수를 표현하면 다음과 같이 나타낸다.

$$f(v, r, t) = n(r, t) \sum_{l=0}^{l_{max}} \sum_{m=-l}^l f_m^{(l)}(v) Y_m^{(l)}(\theta, \phi) \quad \dots\dots\dots (2-1)$$

여기서  $f_m^{(l)}(v)$ 는 텐서(tensor)계수,  $Y_m^{(l)}(\theta, \phi)$ 는 구면조화이며,

**3. 전자충돌단면적**

그림1과 2는 Double shutter drift tube라는 진공 실험 장치와 다항근사 볼츠만 방정식 해법을 이용한 전자군 방법에 의해 결정되었고, 본 연구의 시뮬레이션을 위해 이용된 CF<sub>4</sub><sup>[3]</sup>와 C<sub>3</sub>F<sub>8</sub><sup>[4]</sup>분자가스의 전자충돌단면적 세트이다. 그림에서 보는 바와 같이 두 가스는 약 0.1 eV의 낮은 에너지 영역에서 Ramsauer Townsend Minimum(RTM)을 갖은 운동량변화단면적과 그 에너지 범위에서 큰 여러 개의 진동여기단면적으로 구성되어 있다. 이러한 단면적의 구조는 확산방전스위치의 전도단계에서 요구하는 전자기동속도의 값이 E/N증가와 더불어 계속 증가하는 것이 아니라 어느 영역에서 최대값을 얻는 NDC현상이 보일 것이다. 두 단면적의 비교에서 보이는 또 하나의 두드러진 특징은 C-F의 수가 증가할수록 부착단면적의 값이 크다는 것이다. 본 연구에서 단면적 데이터의 정확성이 떨어져 도시하지 않은 C<sub>2</sub>F<sub>6</sub>의 부착단면적은 CF<sub>4</sub>와 C<sub>3</sub>F<sub>8</sub>가스의 중간 크기를 가지고 있고, 단면적의 크기뿐 아니라 단면적을 이용하여 산출된 전자기동속도를 비롯한 모든 전자수송계수의 결과에서도 중간 값을 보였다.

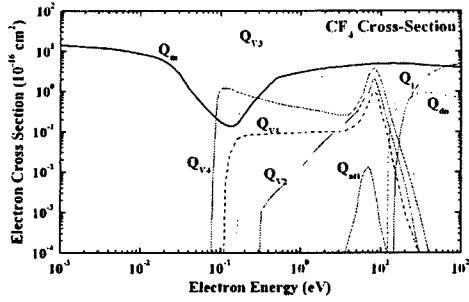


그림 1. CF<sub>4</sub>분자가스의 전자충돌단면적 세트  
Fig. 1. Electron collision cross sections set for CF<sub>4</sub> molecular gas

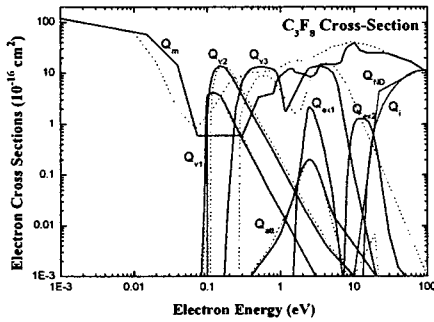


그림 2. C<sub>3</sub>F<sub>8</sub> 분자가스의 전자충돌단면적 세트  
Fig. 2. Electron collision cross sections set for C<sub>3</sub>F<sub>8</sub> molecular gas

#### 4. 전자수송계수

그림3과 4는 다항근사 볼츠만 방정식을 이용하여 산출한 CF<sub>4</sub>와 C<sub>3</sub>F<sub>8</sub>분자가스에서의 전자기동속도와 횡축확산계수의 결과이다.

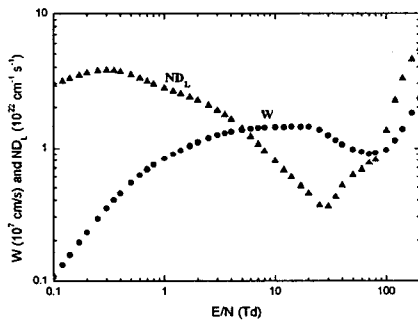


그림 3. CF<sub>4</sub>가스에서의 전자기동속도와 횡축확산계수  
Fig. 3. Electron drift velocity and the longitudinal diffusion coefficient in pure CF<sub>4</sub> molecular gas

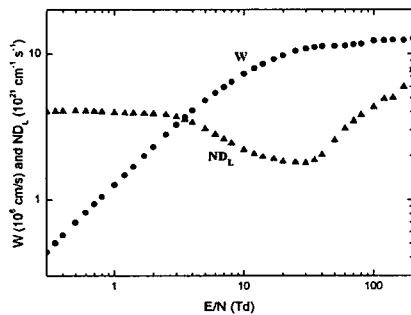


그림 4. C<sub>3</sub>F<sub>8</sub>가스에서의 전자기동속도와 횡축확산계수  
Fig. 4. Electron drift velocity and the longitudinal diffusion coefficient in pure C<sub>3</sub>F<sub>8</sub> molecular gas

그림에서 보는바와 같이 NDC현상은 C<sub>3</sub>F<sub>8</sub>에 비해 CF<sub>4</sub>에서 더 두드러지게 보이고 있으며, 확산방전스위치의 이상적인 전도단계 범위보다 높은 E/N 영역에서 전자기동속도의 최대치를 보이고 있다.

그림 5는 2항근사 볼츠만 해석에 의해 산출된 CF<sub>4</sub>, C<sub>3</sub>F<sub>8</sub>분자가스의 전자 부착계수를 나타내고 있다. 그림에서 보이는 바와 같이 부착단면적이 큰 C<sub>3</sub>F<sub>8</sub>가스가 CF<sub>4</sub>에 비해 큰 부착값을 보이고 있으며, 이는 C<sub>3</sub>F<sub>8</sub>가스의 우수한 절연내력을 보여주고 있다. 또한 두 가스 모두 이상적인 전도단계에 해당하는 120Td 영역에 있으나 CF<sub>4</sub>보다 C<sub>3</sub>F<sub>8</sub>가 전도능력이 더 우수함을 나타내고 있다.

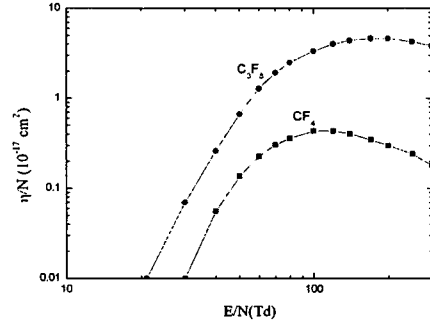


그림 5. CF<sub>4</sub>, C<sub>3</sub>F<sub>8</sub>분자가스의 전자부착계수  
Fig. 5. Electron attachment coefficient in pure CF<sub>4</sub>, C<sub>3</sub>F<sub>8</sub> molecular gas

#### 4. 결 론

본 논문에서는 확산방전스위치에 가장 적합한 C<sub>n</sub>F<sub>2n+2</sub>(n=1,2,3)가스 중 CF<sub>4</sub>, C<sub>3</sub>F<sub>8</sub>분자가스의 전자충돌단면적을 해석하고, 확산방전스위치 해석에 필요한 전자기동속도와 부착계수를 볼츠만방정식 해석을 통해 알아보았다. 그 결과 순수 상태에서는 전도상태에 해당하는 적절한 전자기동속도의 적절치를 얻을 수 없었으나, 전도단계에서는 이상적 범위에 속하므로 두 가스의 절연내력과 전도상태를 확인할 수 있었다. 이에 Ar, N<sub>2</sub> 등의 희가스와의 혼합이나 같은 CF계 가스와의 혼합을 통해 이상적인 확산방전스위치를 시뮬레이션을 통해 설계할 수 있게 되었다.

#### [참 고 문 헌]

- [1] S. R. Hunter, J. G. Carter and L. G. Christophorou, "Electron transport studies of gas mixtures for use in e-beam controlled diffuse discharge switches", J. Appl. Phys. 58, 8, 3001-3015, 1985
- [2] B. H. Jeon, "Determination of the electron collision cross sections set of Oxygen molecule by using an electron swarm study" JKPS 43, 4, 513-525, 2003
- [3] 林勇一, 中村義春, "電子 스웜법によるCF<sub>4</sub>分子の低エネルギー電子衝突斷面積に関する研究", 慶應大學大学院 碩士學位論文, 1997
- [4] B. H. Jeon, "Determination of electron collision cross sections set for C<sub>3</sub>F<sub>8</sub> molecular gas", JKPS 2006년 투고 심사중